



TITLE:

対称帯行列のスツルム・逆反復法 について(スーパーコンピュータの ための数値計算アルゴリズムの研究)

AUTHOR(S):

村田, 健郎; 長谷川, 秀彦

CITATION:

村田, 健郎 ...[et al]. 対称帯行列のスツルム・逆反復法について(スーパーコンピュータのための数値計算アルゴリズムの研究). 数理解析研究所講究録 1987, 613: 74-90

ISSUE DATE:

1987-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/99798>

RIGHT:

対称帯行列のスツルム・逆反復法について.

図書館情報大学 村田健郎 (Kenro Murata)

長谷川秀彦 (Hidehiko Hasegawa)

表記に関連した二つの話題:

1. 上階段化ガウス使用の逆反復法

2. 二分法に軸選択なしの対称ガウスを使用すること

について報告する. 何れも'86年初夏, 軽井沢での数値解析研究会⁽⁶⁾にて言及したもので、その後始末のようなものである.

1. 上階段化ガウス使用の逆反復法

二分法ののち, シフト点固定の逆反復法: $(A - \alpha I)\bar{x}^{(v)} = x^{(v-1)}$ において, $A - \alpha I$ を上階段化分解して, $A = LU$ とし, U が, $n-k$ 階段となるならば, α は k 重複の固有値だから, U から k 本の一次独立な固有ベクトルを求めるようにすれば効率がよいであろう. この原理に従ったプログラムを作成して, スツルム・逆反復法を構成し, 普通のカウス LU 分解によるものと比較した.

結果は, 上階段化が効力を発揮する場合は稀であった. 二分法の制御と, 逆反復の中の選択的直交化の制御が前報の段階でほぼ十分に改良されていて, 殆んどいつでも, 僅かの逆反復回数によって収束するようになったからである.

2. 二分法への軸選択なし対称ガウスの導入について.

二分法におけるスツルムカウントを Martin-Wilkinson の特殊ガウスによって行なう方法は手堅けれども計算の負担は大きい。代りに軸選択なしの対称ガウスを使用する方法が非公式に行なわれているが、 $A - \alpha I$ は対称だけれども正定値でないから、しばしば途中でピボットがゼロ（に近い値）になる。じつはピボットが $10^{-9} \times \|A\|_1$ 程度でも、ときにはカウントを間違えることを筆者は経験的に知っている。（経験上 $10^{-7} \times \|A\|_1$ 以上なら間違えないようである。）

このような危い方法を仲間に入れての、安全な二分法のプログラムは作れないか？ それが本報告の主題である。二通りのやり方を試みた：

2a) ピボットが $10^{-6} \times \|A\|_1$ 以下になったらコントロールをマーチン・ウイルキンソンの特殊ガウス使用のルーチンに引き渡す。—有効使用の範囲が限られるが、どの程度か？—

2b) ピボットが（例えば） $0.88 \times 10^{-15} \times \|A\|_1$ 以下になったら上記同様マーチン・ウイルキンソンに任せるが、そうでなければ対称ガウスによってカウントさせる。カウントがすこしぐらい間違っても、逆反復の中の再直交化を強化して、得られる固有値・固有ベクトルは正しく求まるようし向ける。

—この方法で、はたしてどれくらいうまく行くか？—

• 以上、二つの試行結果について報告する。

3 テストに用いた行列

重複,あるいは重複に近い固有値群が多数ある問題を、手軽に作るために、一般化ポアソン方程式：

$$\operatorname{div}(-k(x,y)\nabla u) = f \quad (= \text{次元})$$

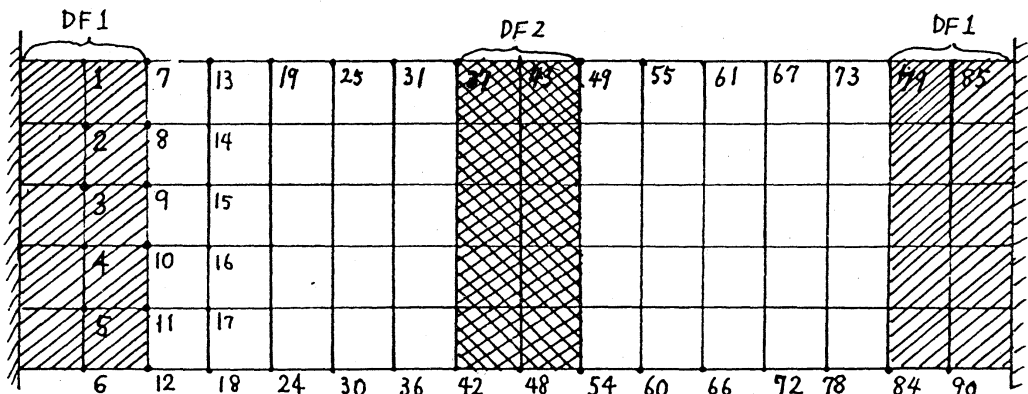
を差分離散化したときの左辺の行列を利用した。下図において、□部の $k(x,y)$ 値を1とし、▨の $k(x,y)$ 値：DF1, DF2 をいろいろに変えるのである*。M1=8, N=152 のとき、

DF1=DF2= 10^{-15} のもの, DF1= 10^{-15} ; DF2= 10^{-13} のものの2例につき、その固有値の‘真の’値がどうなっているかを次頁と次々頁に示す。たとえば初めの例の場合の固有値の特徴を要約すると次のようになっている：

$\lambda_1 = 0.18 \times 10^{-16}$, $\lambda_2 \sim \lambda_4$: 0.8×10^{-15} 以下,

$\lambda_5 \sim \lambda_{18}$: $(0.12 \sim 0.30) \times 10^{-14}$, $\lambda_{19} \sim \lambda_{26}$: $(0.38 \sim 0.58) \times 10^{-14}$,

λ_{27} 以上 : 2重複と4重複が多数あらわれる。



M1 = 8 → N = 152, M1 = 10 → N = 230, M1 = 15 → N = 495

M1 = 20 → N = 860, M1 = 25 → N = 1325, M1 = 30 → N = 1890

* 右側のDF1のところが無い場合のプログラムなら、文献3)の付録にのっている。

$M1 = 8, N = 152$, $DF1 = DF2 = 10^{-15}$ の場合の '真の' 固有値
(4倍精度で計算)

N : 152		DF : 0.1000Q-14 0.1000Q-14		VSUP : 0.1000Q+01			
*** EPSBIO :	0.220000000000000Q-18	***	*** BISECTION :	77.1091461			
*** EPSGLO :	0.220000000000000Q-19	***	*** INV. ITER.:	13.3647881			
*** EPSEO :	0.220000000000000Q-19	***	*** TOTAL :	90.4739227			
K	EIG	RNORM	NREP	NC	L	NBACK	ALFA
1	0.179898591346347699Q-16	0.80Q-29	62	1	4	1	0.177809156287623Q-16
2	0.134044981242980459Q-15	0.80Q-29	6	2	4	1	0.134007388519208Q-15
3	0.754568192319482744Q-15	0.35Q-24	8	3	4	1	0.753303669442928Q-15
4	0.805928453060856756Q-15	0.35Q-24	6	4	4	1	0.805345373722233Q-15
5	0.120484676118550348Q-14	0.11Q-24	7	5	4	1	0.120216336885193Q-14
6	0.150000000000001249Q-14	0.34Q-22	8	6	4	1	0.149923476411296Q-14
7	0.150750263338060166Q-14	0.40Q-19	2	9	4	1	0.150790838149284Q-14
8	0.150913538739958406Q-14	0.40Q-19	0	9	4	1	0.150790838149284Q-14
9	0.157820114798057658Q-14	0.16Q-17	0	9	4	1	0.150790838149284Q-14
10	0.150917250064206982Q-14	0.16Q-17	6	10	4	1	0.157599627792493Q-14
11	0.191538524448835140Q-14	0.13Q-19	8	11	4	1	0.191686944095437Q-14
12	0.232831021549411386Q-14	0.50Q-20	8	13	4	1	0.232843258562987Q-14
13	0.232932600604151893Q-14	0.19Q-20	0	13	4	1	0.232843258562987Q-14
14	0.238262938372059275Q-14	0.82Q-20	6	14	4	1	0.238220901338515Q-14
15	0.268149665982571879Q-14	0.21Q-21	8	15	4	1	0.267928040864618Q-14
16	0.291712159215688032Q-14	0.33Q-21	7	16	4	1	0.291650384398601Q-14
17	0.299999999999983624Q-14	0.48Q-21	6	18	4	1	0.299977057083289Q-14
18	0.299999999999995151Q-14	0.29Q-21	0	18	4	1	0.299977057083289Q-14
19	0.382621147576345833Q-14	0.38Q-20	11	19	4	1	0.382549894539785Q-14
20	0.382879333445694010Q-14	0.38Q-20	1	20	4	1	0.382896839234981Q-14
21	0.465662043104710956Q-14	0.11Q-22	9	22	4	1	0.465643149039074Q-14
22	0.465662043104733801Q-14	0.40Q-21	0	22	4	1	0.465643149039074Q-14
23	0.536239395320641593Q-14	0.18Q-20	10	24	4	1	0.536246394511330Q-14
24	0.53627149877749123Q-14	0.18Q-20	0	24	4	1	0.536246394511330Q-14
25	0.583424318431392097Q-14	0.15Q-22	8	26	4	2	0.583430873057900Q-14
26	0.583424318431391901Q-14	0.51Q-22	0	26	4	2	0.583430873057900Q-14
27	0.131373997131410409Q+00	0.22Q-27	56	28	4	26	0.131373997131410Q+00
28	0.131373997131410571Q+00	0.46Q-27	0	28	4	26	0.131373997131410Q+00
29	0.131373997131410571Q+00	0.30Q-23	7	30	4	26	0.131373997131411Q+00
30	0.131373997131410409Q+00	0.30Q-23	0	30	4	26	0.131373997131411Q+00
31	0.228048000547887325Q+00	0.11Q-31	55	32	4	30	0.228048000547887Q+00
32	0.228048000547887325Q+00	0.11Q-31	0	32	4	30	0.228048000547887Q+00
33	0.461599914289792666Q+00	0.11Q-31	57	34	4	32	0.461599914289793Q+00
34	0.461599914289792666Q+00	0.10Q-31	0	34	4	32	0.461599914289793Q+00
35	0.508307563762165306Q+00	0.17Q-31	58	36	4	34	0.508307563762165Q+00
36	0.508307563762165306Q+00	0.15Q-31	0	36	4	34	0.508307563762165Q+00
37	0.542357604968811657Q+00	0.13Q-31	54	38	4	36	0.542357604968812Q+00
38	0.542357604968811657Q+00	0.34Q-18	0	38	4	36	0.542357604968812Q+00
39	0.542357604968812001Q+00	0.34Q-18	10	40	4	36	0.542357604968812Q+00
40	0.542357604968812001Q+00	0.49Q-30	0	40	4	36	0.542357604968812Q+00
41	0.922859935670806574Q+00	0.20Q-31	57	42	4	40	0.922859935670807Q+00
42	0.922859935670806574Q+00	0.24Q-31	0	42	4	40	0.922859935670807Q+00
43	0.946122249963346099Q+00	0.98Q-32	55	44	4	42	0.946122249963346Q+00
44	0.946122249963346099Q+00	0.12Q-31	0	44	4	42	0.946122249963346Q+00
45	0.958326695424826914Q+00	0.14Q-31	53	46	4	44	0.958326695424827Q+00
46	0.958326695424826914Q+00	0.25Q-19	0	46	5	44	0.958326695424827Q+00
47	0.958326695424827570Q+00	0.25Q-19	9	48	4	44	0.958326695424828Q+00
48	0.958326695424827570Q+00	0.17Q-31	0	48	4	44	0.958326695424828Q+00

658

193

0.16Q-17

$M1 = 8$, $N = 152$, $DF1 = 10^{-15}$, $DF2 = 10^{-13}$ の場合.
(4倍精度で計算)

```

      N : 152   DF : 0.1000Q-14 0.1000Q-12   VSUP : 0.1000Q+01
*** EPSBIO : 0.220000000000000Q-18 ***      *** BISECTION : 82.0639343
*** EPSGLO : 0.220000000000000Q-19 ***      *** INV. ITER.: 13.8441629
*** EPSEO : 0.220000000000000Q-19 ***      *** TOTAL : 95.9080963
K      EIG      RNORM  NREP  NC  L  NBACK      ALFA
1 0.238640759354332794Q-16 0.15Q-27 60 1 4 1 0.225514051876985Q-16
2 0.754568192319517641Q-15 0.25Q-22 8 2 4 1 0.753303669442928Q-15
3 0.773156289333030463Q-15 0.25Q-22 3 3 4 1 0.772385627678673Q-15
4 0.117717194183345325Q-14 0.43Q-25 7 4 4 1 0.117440779323630Q-14
5 0.150000000000507237Q-14 0.21Q-21 8 5 4 1 0.149923476411296Q-14
6 0.150662017298772203Q-14 0.22Q-21 2 6 4 1 0.150617365801686Q-14
7 0.150913638461822142Q-14 0.28Q-21 0 7 4 1 0.150790838149284Q-14
8 0.191372451565894191Q-14 0.69Q-25 8 8 4 1 0.190993054705046Q-14
9 0.232831021340339789Q-14 0.74Q-21 8 10 4 1 0.232843258562987Q-14
10 0.232804844484446456Q-14 0.74Q-21 0 10 4 1 0.232843258562987Q-14
11 0.268126688630247494Q-14 0.17Q-25 8 11 4 1 0.267928040864618Q-14
12 0.291712159215696049Q-14 0.17Q-25 7 12 4 1 0.291650384398601Q-14
13 0.2999999999999999895Q-14 0.96Q-26 6 13 4 1 0.299977057083289Q-14
14 0.382601760293225102Q-14 0.24Q-25 8 14 4 1 0.381986109410093Q-14
15 0.465662043104710985Q-14 0.24Q-25 6 15 4 1 0.465252836256980Q-14
16 0.536234133707953266Q-14 0.79Q-26 8 16 4 1 0.535856081729236Q-14
17 0.583424318431392135Q-14 0.78Q-26 6 17 4 1 0.583040560275805Q-14
18 0.110575671822016350Q-13 0.22Q-28 6 18 4 1 0.110189635194047Q-13
19 0.150913638463872458Q-12 0.44Q-25 11 19 4 1 0.150893186834367Q-12
20 0.155404342231648686Q-12 0.52Q-20 6 20 1 1 0.155389590084098Q-12
21 0.236478952247687321Q-12 0.43Q-20 8 21 4 1 0.236477504245158Q-12
22 0.29999999999999978895Q-12 0.23Q-20 6 22 4 1 0.299538172043867Q-12
23 0.382798772660655689Q-12 0.24Q-21 6 23 4 1 0.382360809680904Q-12
24 0.465662043104700763Q-12 0.14Q-20 9 24 4 1 0.465627536527791Q-12
25 0.536261904412956328Q-12 0.75Q-21 6 25 4 1 0.535793631684101Q-12
26 0.583424318431384786Q-12 0.72Q-21 6 26 4 1 0.583089132533132Q-12
27 0.131373997131422695Q+00 0.18Q-27 56 28 4 26 0.131373997131423Q+00
28 0.131373997131422695Q+00 0.46Q-27 0 28 4 26 0.131373997131423Q+00
29 0.131373997131430879Q+00 0.15Q-26 12 30 4 28 0.131373997131431Q+00
30 0.131373997131430879Q+00 0.28Q-25 0 30 4 28 0.131373997131431Q+00
31 0.228048000547908327Q+00 0.20Q-27 55 32 4 30 0.228048000547908Q+00
32 0.228048000547908327Q+00 0.20Q-27 0 32 4 30 0.228048000547908Q+00
33 0.461599914289813865Q+00 0.89Q-28 57 34 4 32 0.461599914289814Q+00
34 0.461599914289813865Q+00 0.89Q-28 0 34 4 32 0.461599914289814Q+00
35 0.508307563762184613Q+00 0.96Q-28 58 36 4 34 0.508307563762185Q+00
36 0.508307563762184613Q+00 0.96Q-28 0 36 4 34 0.508307563762185Q+00
37 0.542357604968827531Q+00 0.35Q-28 54 38 4 36 0.542357604968828Q+00
38 0.542357604968827531Q+00 0.65Q-27 0 38 4 36 0.542357604968828Q+00
39 0.542357604968844953Q+00 0.64Q-27 14 40 4 38 0.542357604968845Q+00
40 0.542357604968844953Q+00 0.21Q-29 0 40 4 38 0.542357604968845Q+00
41 0.922859935670839817Q+00 0.24Q-28 57 42 4 40 0.922859935670840Q+00
42 0.922859935670839817Q+00 0.24Q-28 0 42 4 40 0.922859935670840Q+00
43 0.946122249963364213Q+00 0.53Q-28 55 44 4 42 0.946122249963364Q+00
44 0.946122249963364213Q+00 0.53Q-28 0 44 4 42 0.946122249963364Q+00
45 0.958326695424839909Q+00 0.26Q-29 53 46 4 44 0.958326695424840Q+00
46 0.958326695424839909Q+00 0.26Q-29 0 46 4 44 0.958326695424840Q+00
47 0.958326695424873014Q+00 0.86Q-28 14 48 4 46 0.958326695424873Q+00
48 0.958326695424873014Q+00 0.47Q-26 0 48 4 46 0.958326695424873Q+00

```

702

189

0.52Q-20

4 上階段化の効果のテストデータ例:

$M=8$, $N=152$ の場合の, 前節の 2 ケースについて, 上階段化の場合と普通の場合との比較データを次頁の表 1 にまとめてある。ここに,

EPSBIO : 二分法をどこで打ちきるかを指定するもの:

$$\|A\bar{v}_i - \bar{\lambda}_i \bar{v}_i\| < \text{EPSBIO} * \|A\|_1$$

となったら二分法を打ちきって逆反復法に移る。

EP SGLO : 逆反復法の LU 分解にて、ピボット値をゼロと見なすかどうかの判定に使われる。常識的には 0.22×10^{-15} に選ばれる。ここでは 0.22×10^{-15} のものと 0.11×10^{-15} のものを示した。ピボットが $\|A\|_1 * \text{EP SGLO}$ 以下のとき、上階段化法と、普通の方法のそれぞれに対応した処理を行う。詳細は文献 (2) に報告する。

残差: 計算された $\bar{\lambda}_i, \bar{v}_i$ による $\|A\bar{v}_i - \bar{\lambda}_i \bar{v}_i\|_2$ の値である。

混り分: 計算された \bar{v}_i に、真の固有ベクトル v_j ($j \neq i$) が最大どの程度混ったかを示す量で、概算式

$$\bar{v}_i \doteq v_i + \sum_{j \neq i} m_{ij} v_j, \quad m_{ij} = \bar{v}_j^T \bar{v}_i / (\bar{\lambda}_i - \bar{\lambda}_j)$$

での, $|m_{ij}|$ が 10^4 以上の (i,j) の個数である。概算式のもとなる公式はウイルキンソンの本 (5) に、そして概算式の '概算の信頼度' については文献 (1) に書いておいた。

表1 上階段化の効果のテスト例

		DF1 = DF2 = 10^{-15}		DF1 = 10^{-15} , DF2 = 10^{-13}	
		上階段化	普通	上階段化	普通
EPSB10 0.176 D-14 EPSGLO 0.22 D-15	逆復	2.46 秒	7.18 秒*	3.16	3.49
	TOTAL	18.43 秒	23.15 秒	20.46	20.79
	残差 混り分	0.21 D-13 456	0.12 D-12 689	0.1 D-13 247	0.12 D-13 424
**					
0.176 D-14 —— 0.11 D-15		2.58	3.04 _{1.17倍}	3.14	3.49 _{1.11倍}
		18.54	19.00	20.44	20.79
		0.31 D-14 597	0.21 D-13 690	0.11 D-13 299	0.68 D-14 384
**					
0.88 D-15 —— 0.22 D-15		2.59	3.23 _{1.24}	3.37	3.66 _{1.08}
		18.90	19.54	21.35	21.64
		0.47 D-14 555	0.35 D-13 591	0.43 D-14 290	0.23 D-14 391
**					
0.88 D-15 —— 0.11 D-15		2.51	3.10 _{1.23倍}	3.24	3.61 _{1.11倍}
		18.83	19.42	21.24	21.61
		0.14 D-13 591	0.98 D-14 595	0.16 D-13 309	0.23 D-14 376
**					
* こういうことが 頻繁にあれば、上階段化の甲斐があるのだが...					
** ‘混り分’ で見ると、上階段化の方が、かなり勝れてはいる。					

この例でみられるように、上階段化の効果があらわれるような場合は、問題としてはかなり特殊な場合に限られ、それも、効果そのものが大きくはない。上階段化のプログラムの複雑さに見合ったものとは言い難いのである。

出力例を示そう。これは $DF1=DF2=10^{-15}$ のものである。

```

*** N      : 152
*** DF1    : 0.1000000000000000-14
*** DF2    : 0.1000000000000000-14
*** USUP    : 0.1000000000000000+01
*** EPSBIO  : 0.1760000000000000-14
*** EPSGLO  : 0.1100000000000000-15
*** EPSEO   : 0.2200000000000000-15

***
EPGSLU : 0.8800-15 K : 1 IR : 10
EPGSLU : 0.8800-15 K : 11 IR : 2

*** BISECTION : 15.9643707
*** INV. ITER.: 2.58312416
*** TOTAL     : 18.5474854

```

K	EIG	RNORM	NREP	NC	L	NBACK	ALFA
1	0.1776356839400250460-14	0.780-15	50	26	-1	1	0.1776356839400250-14
2	0.1776356839400250460-14	0.570-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
3	0.1776356839400250460-14	0.860-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
4	0.1776356839400250460-14	0.640-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
5	0.1776356839400250460-14	0.820-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
6	0.1776356839400250460-14	0.840-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
7	0.1776356839400250460-14	0.800-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
8	0.1776356839400250460-14	0.950-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
9	0.1776356839400250460-14	0.900-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
10	0.1776356839400250460-14	0.670-15	0	26	0	1	0.1776356839400250-14
11	0.3108624468950438310-14	0.310-14	0	26	-1	1	0.3108624468950440-14
12	0.3108624468950438310-14	0.180-14	0	26	0	1	0.3108624468950440-14
13	0.3819739873566121500-14	0.160-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
14	0.3859260401090638310-14	0.240-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
15	0.4042994226646847200-14	0.910-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
16	0.4539438097823340090-14	0.130-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
17	0.4823325975494886520-14	0.470-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
18	0.5597517308480418800-14	0.490-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
19	0.2696415783035348730-14	0.120-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
20	0.3988332441389185850-14	0.210-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
21	0.2236718914879518910-14	0.790-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
22	0.2107884351793288950-14	0.240-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
23	0.5416015502061542840-14	0.140-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
24	0.1330339771210052750-15	0.930-15	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
25	0.3134110688870767790-14	0.220-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
26	0.3482025549960097700-14	0.260-14	0	26	4	1	0.4107825191113080-14
27	0.1313739971314100840+00	0.960-15	44	30	4	26	0.1313739971314070+00
28	0.1313739971314099720+00	0.850-15	0	30	4	26	0.1313739971314070+00
29	0.1313739971314101530+00	0.940-15	0	30	4	26	0.1313739971314070+00
30	0.1313739971314099310+00	0.900-15	0	30	4	26	0.1313739971314070+00
31	0.2280480005478868480+00	0.780-15	43	32	4	30	0.2280480005478880+00
32	0.2280480005478867640+00	0.820-15	0	32	4	30	0.2280480005478880+00
33	0.4615999142897923710+00	0.550-15	45	34	4	32	0.4615999142897940+00
34	0.4615999142897921900+00	0.620-15	0	34	4	32	0.4615999142897940+00
35	0.5083075637621650160+00	0.110-14	46	36	4	34	0.5083075637621610+00
36	0.5083075637621650160+00	0.120-14	0	36	4	34	0.5083075637621610+00
37	0.5423576049688116960+00	0.790-15	42	40	4	36	0.5423576049688080+00
38	0.5423576049688116960+00	0.780-15	0	40	4	36	0.5423576049688080+00
39	0.5423576049688116070+00	0.840-15	0	40	4	36	0.5423576049688080+00
40	0.5423576049688121490+00	0.950-15	0	40	4	36	0.5423576049688080+00
41	0.9228599356708065690+00	0.790-15	45	42	4	40	0.9228599356708020+00
42	0.9228599356708067770+00	0.860-15	0	42	4	40	0.9228599356708020+00
43	0.9461222499633481500+00	0.220-14	43	44	4	42	0.9461222499633470+00
44	0.9461222499633477060+00	0.180-14	0	44	4	42	0.9461222499633470+00
45	0.9583266954248292060+00	0.240-14	41	48	4	44	0.9583266954248250+00
46	0.9583266954248303440+00	0.300-14	0	48	4	44	0.9583266954248250+00
47	0.9583266954248295670+00	0.280-14	0	48	4	44	0.9583266954248250+00
48	0.9583266954248304270+00	0.310-14	0	48	4	44	0.9583266954248250+00

399 146
0.310-14 *** MIXED = 597 (0.100-03) ***

5 2分法に軸選択なしガウスを起用する方法

‘はじめに’では、開発の経過から、2a), 2b) というように、あたかも二種類のプログラムがあるかのような記述をしたが、結果的には、2b) のために行なった逆反復法の改良は、2a) にとっても好ましい手当であるから、プログラムとしては一本である。使い方がちがうだけのこととなる。

次頁に2分法 BISECT のプログラムをのせる。ここに

BSYLV5 : 軸選択なしガウス使用のもの : シルベスターの慣性則に基き、ALFA より小さい固有値の個数 NCT を求める。ガウスにおけるピボットの絶対値が EPSYL 以下になったとき INDEX を 1 にセットする。(BSTURM によってやり直しをさせるためである。)

BSTURM : マーチン・ウイルキンソンの特殊ガウス^{(3),(5)}使用のもの : 機能的には BSYLV5 と同じ。

- DO 130 のループの前と後に分れている。前の方がいわば普通の算法である。ただし最初の IF 文の中に .AND. (XI(K).EQ.XS(K-1)) が入っている。すなわち、 λ_k が λ_{k-1} と分離していない間だけここを行う。分離したら DO 130 のループを、最大 NBIE 回まで行う。NBIE は 8 回ぐらい。
- EPSYL を 10^{-8} 程度にとるか、 10^{-14} 以下にとるかによって、2a 的な使い方と 2b 的な使い方に分れる。

```

*
*      対称ガウス併用の二分法
*
      SUBROUTINE BISECT( N, M1, NE, A, B, NC, NREP, XI,
+      XS, XSUP, EPSBIO, NBIE, MARTIN, SYLO )
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(-M1:0,N), B(-M1:2*M1,N), XI(N+1), XS(0:N),
+      NC(N), NREP(N), MARTIN(N)
*      初期値の設定
      DO 100 I = 1, N
        MARTIN(I) = 0
        XI(I) = 0.000
        XS(I) = XSUP
100    NC(I) = N
        XS(0) = 0.000
        K = 1
        EPSBI = XSUP*EPSBIO
        EPSSYL = XSUP*SYLO
*      二分法
      1 NREP(K) = 0
      2 IF( ( NC(K).GT.K ).OR.( (K.NE.1).AND.(XI(K).EQ.XS(K-1)) ) ) THEN
        IF( (XS(K)-XI(K)).GE.EPSBI ) THEN
          ALFA = (XI(K)+XS(K))/2.000
          NREP(K) = NREP(K) + 1
          CALL BSYLVS( N, M1, A, B, ALFA, EPSSYL, NCT, INDEX )
*      再度カウントする
          IF( INDEX.NE.0 ) THEN
            MARTIN(K) = MARTIN(K)+1
            CALL BSTURM( N, M1, A, B, ALFA, NCT )
          END IF
          DO 110 I = K, NCT
            XS(I) = ALFA
            NC(I) = NCT
110          DO 120 I = NCT+1, N
            XI(I) = MAX( ALFA, XI(I) )
120          GO TO 2
          END IF
        ELSE
*      孤立した場合
          DO 130 NBI = 1, NBIE
            IF( (XS(K)-XI(K)).GE.EPSBI ) THEN
              ALFA = (XI(K)+XS(K))/2.000
              NREP(K) = NREP(K) + 1
              CALL BSYLVS( N, M1, A, B, ALFA, EPSSYL, NCT, INDEX )
*      再度カウントする
              IF( INDEX.NE.0 ) THEN
                MARTIN(K) = MARTIN(K)+1
                CALL BSTURM( N, M1, A, B, ALFA, NCT )
              END IF
              IF( NCT.EQ.K ) THEN
                XS(K) = ALFA
              ELSE
                XI(K) = ALFA
              END IF
            ELSE
              GO TO 3
            END IF
          130    CONTINUE
          3    CONTINUE
        END IF
*      K = NC(K)+1
        IF( K.LE.NE ) GO TO 1
        RETURN
      END

```

```

*
*
*
      Martin-Wilkinsonの特殊ガウス

SUBROUTINE BSTURM( N, M1, A, B, ALFA, NCT )
  IMPLICIT REAL *8 ( A-H,O-Z )
  INTEGER SGNDT, SGNDT0, PSIGN, PSIGN0, PLOCAL
  DIMENSION A(-M1:0,N), B(-M1:M1,N)
  *
  *      初期値の設定
  SGNDT0 = 1
  IP = 1
  PSIGN0 = 1
  NCT = 0
  DO 10 I = 1, N
    DO 20 J = MAX(I-M1,1), I-1
      20 B(J-I,I) = A(J-I,I)
      B(0,I) = A(0,I)-ALFA
      DO 22 J = I+1, MIN(I+M1,N)
        22 B(J-I,I) = A(I-J,J)
      DO 24 J = MIN(I+M1,N)+1, MIN(I+2*M1,N)
        24 B(J-I,I) = 0.0D0
    10 CONTINUE
  *
  *      固有値のカウント
  DO 30 K = 1, N
    *
    *      特殊ガウス
    JMIN = MAX(1,K-M1)
    JMAX = MIN(K+M1,N)
    DO 40 I = JMIN, K-1
      IF( ABS(B(0,I)).LT.ABS(B(I-K,K)) ) THEN
        IP = -IP
        DO 50 J = I, JMAX
          W = B(J-I,I)
          B(J-I,I) = B(J-K,K)
          50 B(J-K,K) = W
        END IF
        IF( ABS(B(0,I)).GT.0.0 ) THEN
          T = -B(I-K,K)/B(0,I)
          DO 60 J = I, JMAX
            60 B(J-K,K) = B(J-K,K)+T*B(J-I,I)
          END IF
        40 CONTINUE
      *
      *      符号のカウント
      IF( (K-M1).LE.1 ) THEN
        PSIGN = 1
        DO 70 I = 1, K
          IF( B(0,I).LT.0.0 ) PSIGN = -PSIGN
          70 CONTINUE
        SGNDT = IP*PSIGN
      ELSE
        IF( B(0,K-M1-1).LT.0.0 ) PSIGN0 = -PSIGN0
        PSIGN = 1
        DO 75 I = K-M1, K
          IF( B(0,I).LT.0.0 ) PSIGN = -PSIGN
          75 CONTINUE
        SGNDT = IP*PSIGN*PSIGN0
      END IF
      IF( (SGNDT0*SGNDT).LT.0 ) NCT = NCT+1
      SGNDT0 = SGNDT
    30 CONTINUE
  RETURN
END

```

← Martin-Wilkinsonの特殊ガウス

と
↓ シルベスターの慣性則を用いた
対称ガウス.

```

*
*
*
      シルベスターの定理
      固有値のカウント

SUBROUTINE BSYLVS( N, M1, A, B, ALFA,
  *      EPSSYL, NCT, INDEX )
  *
  IMPLICIT REAL*8 ( A-H,O-Z )
  DIMENSION A(-M1:0,N), B(-M1:M1,N)
  *
  *      初期値の設定
  NCT = 0
  INDEX = 0
  DO 10 I = 1, N
    B(0,I) = A(0,I)-ALFA
    DO 22 J = I+1, MIN(I+M1,N)
      22 B(J-I,I) = A(I-J,J)
    10 CONTINUE
  *
  *      固有値のカウント
  DO 30 K = 1, N
    JMAX = MIN(K+M1,N)
    IF( B(0,K).LT.0.0 ) NCT = NCT+1
    *
    *      ガウスの消去法
    IF( ABS(B(0,K)).GT.EPSSYL ) THEN
      DO 40 I = K+1, JMAX
        T = -B(I-K,K)/B(0,K)
        DO 50 J = I, JMAX
          50 B(J-I,I) = B(J-I,I)+T*B(J-K,K)
        40 CONTINUE
      ELSE
        INDEX = K
        RETURN
      END IF
    30 CONTINUE
  RETURN
END

```

5.1 2a の使い方のテストデータ

ピボットが $\|A\|_1 * EPSGLO$ 以下になったときマーチン・ウィルキンソンの特殊ガウスに、どれぐらい任せられるかを調べたものを例示しよう。

$M1 = 8, N = 152$ の場合 ($EPSB10 = 0.176 D-14, EPSGLO = 0.22 D-15$)

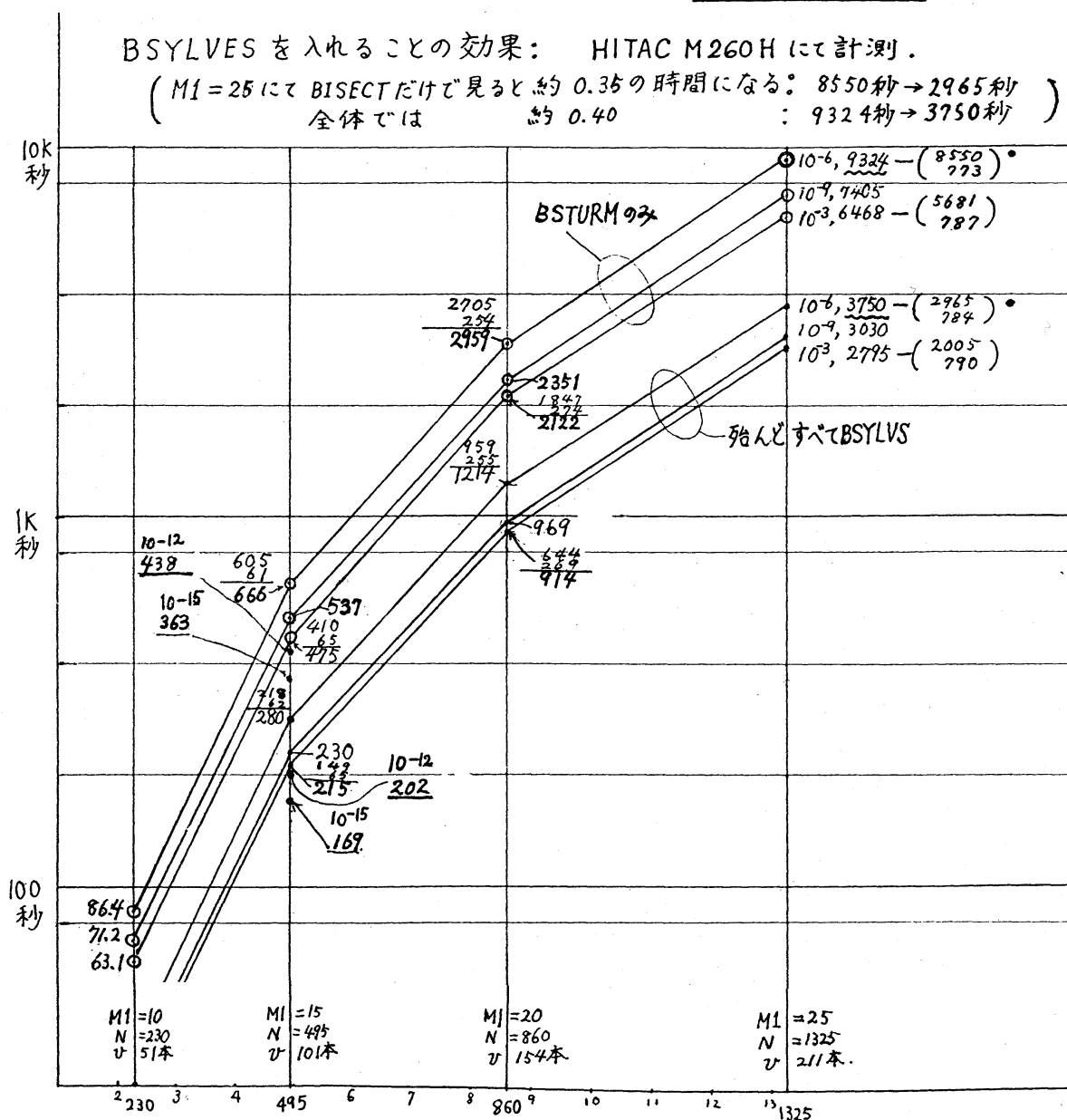
DF →		10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}
もとの まい (すべて8 マーチン・ ウィルキン)	BISECT (秒)	21.9 (秒)	32.0 (秒)	25.9 (秒)
	TOTAL (秒)	26.1 (秒)	36.0 (秒)	29.7 (秒)
	BSTURM (回)	535 (回)	782 (回)	639 (回)
epsylo 10^{-8}	BISECT (秒) (比)	8.6 (0.39)	29.1 (0.91)	23.8 (0.91)
	TOTAL (秒) (比)	12.7 (0.48)	32.9 (0.91)	27.5 (0.92)
	BSTURM (回) (比)	8 (0.014)	500 (0.64)	435 (0.68)
epsylo 10^{-10}	上に同じ	8.3 (0.38)	22.0 (0.68)	21.8 (0.84)
		12.3 (0.48)	25.9 (0.71)	25.5 (0.86)
		0 (0.0)	292 (0.37)	367 (0.57)
epsylo 10^{-12}	上に同じ		17.4 (0.54)	15.6 (0.60)
			21.3 (0.59)	19.3 (0.65)
			147 (0.19)	161 (0.25)

この例で見られるように、 $epsylo = 10^{-8}$ (カウントを間違えることが殆んどない, 経験値) に設定したのでは、効果のある問題の範囲が限られる。ところで、カウントを間違えても、必ずしも最終的な固有値, 固有ベクトルのあるものを取り逃すわけではない。

5.2 2b の使い方のテストデータ

逆反復法の再直交化の部分を改良して、すこしぐらいカウントを間違えても、最終的な固有値，固有ベクトルは正しく求まるようにした。そのとき、BSTURMのみとくらべてどれぐらい速くなるかを調べたのでグラフで示す：

EPSBIO = 0.352D-15; EPSGLO = 0.11D-15 ; SYLO = 0.22D-15 .



さて紙数の関係で詳細を割愛して、カウントを間違えたとき、不完全な両直交化のプログラムでどのようなことが起るか例示と、プログラム改良ののち、それがどのように直ったかについての例を、1例だけ掲げておく。以下、すべて

$N = 495$, $DF1 = DF2 = 10^{-12}$, 1.0以下の固有値 101個を求めたときのものである。(実際のテストは前頁のすべてのものについて行った)

$SYLO = 10^{-14}$, カウントを間違え、同じ固有ベクトルを4組求めた例。

```

N : 495   DF : 0.1000D-11 0.1000D-11   VSUP : 0.1000D+01      (秒)
*** EPSB10 : 0.880000000000000D-15 ***   *** BISECTION : 207.013
*** EPSGL0 : 0.110000000000000D-15 ***   *** INV. ITER.: 57.5626
*** EPSE0  : 0.220000000000000D-15 ***   *** TOTAL : 264.575

70 0.366141714426299880D+00 0.12D-14 42 1 71 4 69 0.3661417144262990D+00 0
71 0.3661417144263001830D+00 0.12D-14 0 0 71 4 69 0.3661417144262990D+00 0
72 0.4887775046257929330D+00 0.43D-14 45 0 73 4 71 0.4887775046178050D+00 X
73 0.4887775046258136250D+00 0.40D-14 0 0 73 4 71 0.4887775046178050D+00 X
74 0.4887775046257901430D+00 0.30D-14 15 0 75 4 73 0.4887775047125200D+00 X
75 0.4887775046257992060D+00 0.11D-13 0 0 75 4 73 0.4887775047125200D+00 X
76 0.5530346664920077760D+00 0.11D-14 47 2 77 4 75 0.5530346664920080D+00 0
77 0.5530346664920077480D+00 0.11D-14 0 0 77 4 75 0.5530346664920080D+00 0
78 0.5750771107013605550D+00 0.58D-13 44 0 79 4 77 0.5750771106854420D+00 X
79 0.5750771107017640940D+00 0.58D-13 0 0 79 4 77 0.5750771106854420D+00 X
80 0.5750771107013646910D+00 0.58D-13 13 0 81 4 79 0.5750771107140990D+00 X
81 0.5750771107013718240D+00 0.79D-13 0 0 81 4 79 0.5750771107140990D+00 X
82 0.5831663635663770500D+00 0.41D-14 42 1 83 4 81 0.5831663635663710D+00 0
83 0.5831663635663773550D+00 0.44D-14 0 0 83 4 81 0.5831663635663710D+00 0
84 0.6769349528287862130D+00 0.12D-14 45 1 85 4 83 0.6769349528287850D+00 0
85 0.6769349528287862270D+00 0.12D-14 0 0 85 4 83 0.6769349528287850D+00 0
86 0.7441284674109816810D+00 0.12D-14 44 0 87 4 85 0.7441284674109820D+00 0
87 0.7441284674109815840D+00 0.12D-14 0 0 87 4 85 0.7441284674109820D+00 0
88 0.7548119812913648970D+00 0.21D-14 46 0 89 4 87 0.7548119812913660D+00 0
89 0.7548119812913649110D+00 0.22D-14 0 0 89 4 87 0.7548119812913660D+00 0
90 0.7978291121482236490D+00 0.34D-14 43 2 91 4 89 0.7978291121482190D+00 0
91 0.7978291121482241760D+00 0.39D-14 0 0 91 4 89 0.7978291121482190D+00 0
92 0.8172504777145582490D+00 0.51D-14 44 0 93 4 91 0.8172504777144430D+00 X
93 0.8172504777152014010D+00 0.10D-13 0 0 93 4 91 0.8172504777144430D+00 X
94 0.8172504777145574990D+00 0.43D-14 0 0 95 4 93 0.8172504777277820D+00 X
95 0.8172504777151760190D+00 0.11D-12 0 0 95 4 93 0.8172504777277820D+00 X
96 0.8475318083088989730D+00 0.99D-15 43 1 97 4 95 0.8475318083088980D+00 0
97 0.8475318083088988070D+00 0.97D-15 0 0 97 4 95 0.8475318083088980D+00 0
98 0.9383474116878318260D+00 0.50D-14 45 0 99 4 97 0.9383474115947450D+00 X
99 0.9383474116878190160D+00 0.51D-14 0 0 99 4 97 0.9383474115947450D+00 X
100 0.9383474116878309230D+00 0.44D-14 15 0 101 4 99 0.9383474117714750D+00 X
101 0.9383474116878304100D+00 0.48D-14 0 0 101 4 99 0.9383474117714750D+00 X

```

0.11D-12 1204 159 421

↑印がカウントを
間違えているもの。

*** ORTHOGONALITY ***

72	74	-0.100+01*
78	80	-0.100+01*
92	94	-0.100+01*
98	100	-0.100+01*

*** TOTAL :

4

両直交化プログラム改良前

のとき、4組、同じ固有ベクトルを求めた

カウントは間違えたが答は正しく求めている例：（前頁と同じ問題）

```

N : 495      DF : 0.1000D-11  0.1000D-11
*** EPSB10 : 0.352000000000000D-14 ***
*** EPSGL0 : 0.110000000000000D-15 ***
*** EPSE0  : 0.220000000000000D-15 ***
*** SYL0   : 0.220000000000000D-15 ***
*** BISECTION : 144.914
*** INV. ITER. : 58.0639
*** TOTAL    : 202.978

```

K	EIG	RNORM	NREP	STRM	NC	L	NBACK	ALFA	
1	0.1063138870037181030D-13	0.130D-14	49	0	1	4	1	0.355271367880050D-14	
2	0.7840605505639643680D-13	0.120D-14	2	0	2	4	1	0.7460698725481050D-13	
3	0.7500343856990506670D-12	0.240D-16	5	1	3	4	1	0.7425171588693050D-12	
4	0.7675628995827277160D-12	0.260D-15	1	0	4	4	1	0.7709388682997090D-12	
5	0.1073493306533506050D-11	0.350D-15	6	0	5	4	1	0.1069366817318950D-11	
<hr/>									
45	0.5905684464329297290D-11	0.650D-13	0	0	45	4	17	0.5815792292196420D-11	
46	0.5954211142782702330D-11	0.320D-14	5	0	47	4	20	0.5943689984633240D-11	
47	0.5867833532313158590D-11	0.650D-13	0	0	47	4	20	0.5943689984633240D-11	
48	0.4063345123909236230D-01	0.310D-13	41	0	49	4	46	0.4063345122631290D-01	*
49	0.4063345123899800030D-01	0.310D-13	0	0	49	4	46	0.4063345122631290D-01	x
50	0.4063345123909926130D-01	0.160D-13	18	0	51	4	48	0.4063345124402320D-01	x
51	0.4063345123899073960D-01	0.160D-13	0	0	51	4	48	0.4063345124402320D-01	x
52	0.7554608716122762630D-01	0.150D-14	42	0	53	4	50	0.7554608716123210D-01	o
53	0.7554608716122759860D-01	0.160D-14	0	0	53	4	50	0.7554608716123210D-01	o
54	0.1566465536532200690D+00	0.140D-14	43	0	55	4	52	0.1566465536532210D+00	o
55	0.1566465536532200550D+00	0.140D-14	0	0	55	4	52	0.1566465536532210D+00	o
56	0.1607236847420635410D+00	0.120D-14	38	0	57	4	54	0.1607236847420560D+00	o
57	0.1607236847420636520D+00	0.130D-14	0	0	57	4	54	0.1607236847420560D+00	o
58	0.1855488951629243600D+00	0.860D-14	40	0	59	4	56	0.1855488951628570D+00	x
59	0.1855488951630156060D+00	0.850D-14	0	0	59	4	56	0.1855488951628570D+00	x
60	0.1855488951630167030D+00	0.230D-14	0	0	61	4	57	0.1855488951632080D+00	x
61	0.1855488951629236240D+00	0.250D-14	0	0	61	4	57	0.1855488951632080D+00	x
62	0.3023048014555478200D+00	0.180D-14	44	0	63	4	60	0.3023048014555380D+00	o
63	0.3023048014555480690D+00	0.200D-14	0	0	63	4	60	0.3023048014555380D+00	o
64	0.3414154682211460460D+00	0.220D-14	42	0	65	1	62	0.3414154682011490D+00	x
65	0.3414154682212665190D+00	0.210D-14	0	0	65	4	62	0.3414154682011490D+00	x
66	0.3414154682212427600D+00	0.500D-13	12	0	67	4	64	0.3414154682218430D+00	x
67	0.3414154682211753560D+00	0.500D-13	0	0	67	4	64	0.3414154682218430D+00	x
68	0.3482382330955270940D+00	0.160D-14	41	0	69	4	66	0.3482382330955180D+00	o
69	0.3482382330955272750D+00	0.170D-14	0	0	69	4	66	0.3482382330955180D+00	o
70	0.3661417144263002240D+00	0.160D-14	40	0	71	4	68	0.3661417144262950D+00	o
71	0.3661417144263001410D+00	0.150D-14	0	0	71	4	68	0.3661417144262950D+00	o
72	0.4887775046257927520D+00	0.420D-14	43	0	73	4	70	0.4887775046178040D+00	x
73	0.4887775046258136800D+00	0.400D-14	0	0	73	4	70	0.4887775046178040D+00	x
74	0.4887775046257917260D+00	0.610D-14	13	0	75	4	72	0.4887775047125200D+00	x
75	0.4887775046258102800D+00	0.610D-14	0	0	75	4	72	0.4887775047125200D+00	x
76	0.5530346664920119250D+00	0.380D-14	45	0	77	4	74	0.5530346664920000D+00	o
77	0.5530346664920114670D+00	0.340D-14	0	0	77	4	74	0.5530346664920000D+00	o
78	0.5750771107013605830D+00	0.580D-13	42	0	79	4	76	0.5750771106854450D+00	x
79	0.5750771107017641080D+00	0.580D-13	0	0	79	4	76	0.5750771106854450D+00	x
80	0.5750771107017469690D+00	0.110D-12	11	0	81	59	78	0.5750771107140940D+00	x
81	0.5750771107013870620D+00	0.110D-12	0	0	81	4	78	0.5750771107140940D+00	x
82	0.5831663635663753560D+00	0.290D-14	40	0	83	4	80	0.5831663635663670D+00	o
83	0.5831663635663757310D+00	0.310D-14	0	0	83	4	80	0.5831663635663670D+00	o
84	0.6769349528287913200D+00	0.580D-14	43	0	85	4	82	0.6769349528287770D+00	o
85	0.6769349528287916390D+00	0.620D-14	0	0	85	4	82	0.6769349528287770D+00	o
86	0.7441284674109839850D+00	0.280D-14	42	0	87	4	84	0.7441284674109770D+00	o
87	0.7441284674109835820D+00	0.250D-14	0	0	87	4	84	0.7441284674109770D+00	o
88	0.7548119812913688390D+00	0.460D-14	44	0	89	4	86	0.7548119812913580D+00	o
89	0.7548119812913693520D+00	0.500D-14	0	0	89	4	86	0.7548119812913580D+00	o
90	0.7978291121482267300D+00	0.630D-14	41	0	91	4	88	0.7978291121482110D+00	o
91	0.7978291121482267850D+00	0.640D-14	0	0	91	4	88	0.7978291121482110D+00	o
92	0.8172504777145575690D+00	0.440D-14	42	0	93	4	90	0.8172504777144420D+00	x
93	0.8172504777152019010D+00	0.110D-13	0	0	93	4	90	0.8172504777144420D+00	x
94	0.8172504777145594280D+00	0.340D-13	0	0	95	4	92	0.8172504777277820D+00	x
95	0.8172504777151958220D+00	0.350D-13	0	0	95	4	92	0.8172504777277820D+00	x
96	0.8475318083089043030D+00	0.560D-14	41	0	97	4	94	0.8475318083088900D+00	o
97	0.8475318083089042750D+00	0.560D-14	0	0	97	4	94	0.8475318083088900D+00	o
98	0.9383474116878313680D+00	0.460D-14	43	0	99	4	96	0.9383474115947370D+00	x
99	0.9383474116878188500D+00	0.500D-14	0	0	99	4	96	0.9383474115947370D+00	x
100	0.9383474116878282870D+00	0.660D-14	13	0	101	4	98	0.9383474117714780D+00	x
101	0.9383474116878200020D+00	0.660D-14	0	0	101	4	98	0.9383474117714780D+00	x

0.110-12 ¹⁰⁸⁴ ⁷ ⁴⁵⁶ ×印がカウント間違い。
 ↑
 1084回中7回だけマージン・ウールキンソンに
 手渡したことを示している。

BSTURM のみによる出力 : $DF=10^{-12}$ の問題

$M1 = 15$, $N = 495$, $EPSBIO = 0.352D-14$, $EPSGLO = 0.11D-15$.

```

N : 495      DF : 0.1000D-11  0.1000D-11
*** EPSBIO : 0.352000000000000D-14 ***
*** EPSGLO : 0.110000000000000D-15 ***
*** EPSEO  : 0.220000000000000D-15 ***

*** BISECTION : 382.050
*** INV. ITER.: 56.3399
*** TOTAL     : 438.390

K      EIG      RNORM  NREP  NC  L  NBACK  ALFA
1 0.106313887003718103D-13 0.13D-14 49 1 4 1 0.355271367880050D-14
2 0.784060550563964368D-13 0.12D-14 2 2 4 1 0.746069872548105D-13
3 0.750034385699050667D-12 0.24D-16 5 3 4 1 0.742517158869305D-12
4 0.767562899582727716D-12 0.26D-15 1 4 4 1 0.770938868299709D-12
5 0.107349330653350605D-11 0.35D-15 6 5 4 1 0.106936681731895D-11

45 0.590568446432929729D-11 0.65D-13 0 45 4 17 0.581579229219642D-11
46 0.595421114278270233D-11 0.32D-14 5 47 4 20 0.594368998463324D-11
47 0.586783353231315859D-11 0.65D-13 0 47 4 20 0.594368998463324D-11
48 0.406334512389888818D-01 0.29D-14 41 49 4 46 0.406334512389925D-01
49 0.406334512391016076D-01 0.14D-14 0 49 4 46 0.406334512389925D-01
50 0.406334512391013630D-01 0.16D-14 7 51 4 47 0.406334512391062D-01
51 0.406334512389887282D-01 0.15D-14 0 51 4 47 0.406334512391062D-01
52 0.755460871612276402D-01 0.15D-14 42 53 4 50 0.755460871612321D-01
53 0.755460871612275708D-01 0.15D-14 0 53 4 50 0.755460871612321D-01
54 0.156646553653220111D+00 0.14D-14 43 55 4 52 0.156646553653221D+00
55 0.156646553653220097D+00 0.14D-14 0 55 4 52 0.156646553653221D+00
56 0.160723684742063444D+00 0.12D-14 38 57 4 54 0.160723684742056D+00
57 0.160723684742063472D+00 0.13D-14 0 57 4 54 0.160723684742056D+00
58 0.185548895162924332D+00 0.16D-14 40 59 4 56 0.185548895162928D+00
59 0.185548895163015481D+00 0.21D-14 0 59 4 56 0.185548895162928D+00
60 0.185548895163014843D+00 0.31D-14 2 61 4 57 0.185548895163013D+00
61 0.185548895162924082D+00 0.31D-14 0 61 4 57 0.185548895163013D+00
62 0.302304801455547931D+00 0.19D-14 44 63 4 60 0.302304801455538D+00
63 0.302304801455547834D+00 0.19D-14 0 63 4 60 0.302304801455538D+00
64 0.341415468221145560D+00 0.18D-14 42 65 4 62 0.341415468221147D+00
65 0.341415468221268212D+00 0.17D-14 0 65 4 62 0.341415468221147D+00
66 0.341415468221269239D+00 0.90D-14 4 67 4 63 0.341415468221260D+00
67 0.341415468221148502D+00 0.90D-14 0 67 4 63 0.341415468221260D+00
68 0.348238233095527219D+00 0.16D-14 41 69 4 66 0.348238233095518D+00
69 0.348238233095527358D+00 0.17D-14 0 69 4 66 0.348238233095518D+00
70 0.366141714426300197D+00 0.15D-14 40 71 4 68 0.366141714426295D+00
71 0.366141714426300197D+00 0.16D-14 0 71 4 68 0.366141714426295D+00
72 0.488777504625792544D+00 0.32D-14 43 73 4 70 0.488777504625791D+00
73 0.488777504625811557D+00 0.13D-14 0 73 4 70 0.488777504625791D+00
74 0.488777504625788450D+00 0.16D-14 1 75 4 71 0.488777504625805D+00
75 0.488777504625813777D+00 0.26D-14 0 75 4 71 0.488777504625805D+00
76 0.553034666492011828D+00 0.37D-14 45 77 4 74 0.553034666492000D+00
77 0.553034666492011662D+00 0.36D-14 0 77 4 74 0.553034666492000D+00
78 0.575077110701355670D+00 0.29D-14 42 79 4 76 0.575077110701347D+00
79 0.575077110701775349D+00 0.25D-14 0 79 4 76 0.575077110701347D+00
80 0.575077110701778568D+00 0.57D-14 8 81 4 77 0.575077110701773D+00
81 0.575077110701355199D+00 0.24D-14 0 81 4 77 0.575077110701773D+00
82 0.583166363566375232D+00 0.28D-14 40 83 4 80 0.583166363566367D+00
83 0.583166363566375412D+00 0.30D-14 0 83 4 80 0.583166363566367D+00
84 0.676934952828791209D+00 0.57D-14 43 85 4 82 0.676934952828777D+00
85 0.676934952828791833D+00 0.63D-14 0 85 4 82 0.676934952828777D+00
86 0.744128467410983860D+00 0.27D-14 42 87 4 84 0.744128467410977D+00
87 0.744128467410983485D+00 0.24D-14 0 87 4 84 0.744128467410977D+00
88 0.754811981291368866D+00 0.46D-14 44 89 4 86 0.754811981291358D+00
89 0.754811981291369574D+00 0.52D-14 0 89 4 86 0.754811981291358D+00
90 0.797829112148226618D+00 0.62D-14 41 91 4 88 0.797829112148211D+00
91 0.797829112148226771D+00 0.64D-14 0 91 4 88 0.797829112148211D+00
92 0.817250477714557222D+00 0.39D-14 42 93 4 90 0.817250477714556D+00
93 0.817250477715195656D+00 0.46D-13 0 93 4 90 0.817250477714556D+00
94 0.817250477715200555D+00 0.92D-14 6 95 4 91 0.817250477715181D+00
95 0.817250477714557111D+00 0.46D-13 0 95 4 91 0.817250477715181D+00
96 0.847531808308904067D+00 0.54D-14 41 97 4 94 0.847531808308890D+00
97 0.847531808308903858D+00 0.52D-14 0 97 4 94 0.847531808308890D+00
98 0.938347411687820127D+00 0.58D-14 43 99 4 96 0.938347411687818D+00
99 0.938347411687838556D+00 0.94D-14 0 99 4 96 0.938347411687818D+00
100 0.938347411687837515D+00 0.84D-14 1 101 4 97 0.938347411687833D+00
101 0.938347411687815630D+00 0.15D-14 0 101 4 97 0.938347411687833D+00

```

0.65D-13

1046

404

以上のまとめ：

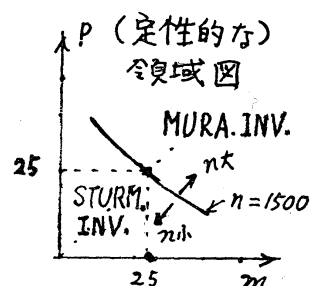
1) 再直交化過程を注意深く設計すれば、殆んどBSYLVSによるカウントで、正しい答を出させることができる。(その際、カウントは間違えるけれども。)そして帯半巾25の問題で、二分法に要する時間を約 $\frac{1}{3}$ に、全計算時間を約 $\frac{1}{10}$ に縮小できる。

2) となると、拡張ハウスホルダー法による三重対角化を経由する方法との比較^{(1)のII}において、この方法の優勢領域がひろがる。(もと帯半巾25、元数1500で固有値10以下であったのが、固有値25あたりまでひろがる。)

(参考)

$$\begin{aligned} \text{スツルム・逆反復} &: \alpha \cdot m^2 n p \\ &(\text{STURM. INV.}) \\ \text{拡張ハウスホルダー・経由} &: 3 m n^2 + \beta \cdot m^2 n p \\ &(\text{MURA. INV.}) \end{aligned}$$

(ただし $\alpha \gg \beta$, p は固有値数)



参考文献：

対称行列

- (1) 村田：標準形固有値解法の見直し(I),(II). (1986)
図書館情報大学研究報告 Vol.5,1.
- (2) 村田：同上 (III) (印刷準備中)
(同上 Vol.5,2)
- (3) 村田：線形代数と線形計算法序説(1986) サイエンス社
- (4) J.H. Wilkinson 'The Algebraic Eigenvalue Problem', OXFORD, (1965)
- (5) J.H. Wilkinson · C. Reinsch 'Linear Algebra' Springer (1971)
- (6) 村田「上階級化ガウスによる逆反復法」第15回数値解析シンポジウム論文集(1986)
於日本大学 軽井沢研修所(1986.5月22-24日)